EFEK ISOTOP KARBON

PADA SPEKTRUM INTERAKSI VIBRASI-ROTASI MOLEKUL KARBONDIOKSIDA

ASAN DAMANIK

EFEK ISOTOP KARBON PADA SPEKTRUM INTERAKSI VIBRASI-ROTASI MOLEKUL KARBONDIOKSIDA

Asan Damanik

Penerbit

Universitas Sanata Dharma

EFEK ISOTOP KARBON PADA SPEKTRUM INTERAKSI VIBRASI-ROTASI MOLEKUL KARBONDIOKSIDA

PENERBIT UNIVERSITAS SANATA DHARMA
Jl. Affandi (Gejayan), Mrican
Tromol Pos 29 Yogyakarta 55281
Telp. (0274) 513301, 515253 Ext.1527/1513
Fax (0274) 562383
e-mail: publisher@usd.ac.id

Diterbitkan oleh:

Penerbit Universitas Sanata Dharma
Jl. Affandi (Gejayan), Mrican
Tromol Pos 29 Yogyakarta 55281
Telp. (0274) 513301, 515253;
Ext.1527/1513
Fax (0274) 562383
e-mail: publisher@usd.ac.id

Penerbit USD

Universitas Sanata Dharma berlambangkan daun teratai coklat bersudut lima dengan sebuah obor hitam yang menyala merah, sebuah buku terbuka dengan tulisan "*Ad Maiorem Dei Gloriam*" dan tulisan "Universitas Sanata Dharma Yogyakarta" berwarna hitam di dalamnya. Adapun artinya sebagai berikut.

Teratai: kemuliaan dan sudut lima: Pancasila; Obor: hidup dengan semangat yang menyala-nyala; Buku yang terbuka: iImu pengetahuan yang selalu berkembang; Teratai warna coklat: sikap dewasa yang matang; "Ad Maiorem Dei Gloriam": demi kemuliaan Allah yang lebih besar.

Asan Damanik

Edit Bahasa:
Aluysia Vicka T.S.
Harris H. Setiajid

Desain Sampul:
Alexander Beny P.

Tata Letak:
Thoms

Cetakan Pertama
x, 70 hlm.; 148 x 210 mm.
ISBN: 978-979-1088-70-1
EAN: 9-789791-088701

PENGANTAR

Buku ilmiah ini ditulis berdasarkan hasil penelitian yang penulis pernah lakukan yang kemudian menimbulkan keinginan penulis untuk ikut memberikan sumbangan dalam penyebaran hasil penelitian dan pengembangan ilmu pengetahuan khususnya Fisika. Penulis memilih topik kajian efek isotop karbon terhadap spektrum molekul karbondioksida dengan pertimbangan bahwa buku ilmiah tentang efek isotop karbon pada spektrum molekul karbondioksida belum ada. Dengan demikian, buku ini diharapkan dapat mengisi kekosongan referensi tentang efek isotop karbon terhadap spektrum molekul karbondioksida.

Penulis menyadari bahwa buku ini sangat jauh dari sempurna. Hasil yang disajikan dalam buku ini sebagian besar hasil studi pustaka yang kemudian dianalisis secara teoretis. Oleh karena itu, kritik dan saran yang konstruktif dari pembaca akan diterima dengan senang hati. Semoga buku ini dapat membangkitkan kegairahan peneliti dan penulis yang lain untuk menerbitkan hasil-hasil penelitian mereka sehingga dapat disempurnakan dan dikembangkan oleh peneliti lain.

Yogyakarta, Desember 2010

Penulis,

Asan Damanik

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL

DAFTAR GAMBAR

Bab 1
PENDAHULUAN

Berdasarkan data yang dikeluarkan oleh *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics Volume 33 Edisi Juli 2006*, jumlah unsur yang ada sebanyak 112 unsur. Sebuah unsur atom X dengan nomor atom Z dan nomor massa A sering dituliskan secara singkat sebagai berikut:

$$^{A}_{Z}X.$$

Nomor atom Z adalah jumlah proton[1] yang ada dalam inti atom, sedangkan nomor massa A adalah jumlah proton dan neutron[2] yang ada dalam inti atom.

Sebagian besar unsur-unsur yang ada di alam berupa isotop-sotop, yakni unsur-unsur atom yang dapat mempunyai beberapa nomor massa dengan nomor atom yang sama. Keberadaan isotop-isotop tersebut berupa isotop stabil dan tidak stabil (radioaktif). Demikian juga kelimpahan (*abundance*) isotop stabil di alam berbeda dari satu kelompok ke kelompok yang lain. Unsur-usur atom yang berupa isotop sering juga dituliskan dengan menuliskan nama atom secara lengkap (atau lambang resmi atom) diikuti dengan angka yang menyatakan nomor massa atom, misalnya atom karbon dengan nomor massa $A = 12$ dan nomor atom $Z = 6$ sering dituliskan karbon-12 atau C-12 atau $^{12}_{6}C$.

---

[1] Proton bermuatan positif dengan besar muatan sama dengan muatan elektron. Proton dilambangkan dengan huruf *p*.

[2] Neutron tidak bermuatan (netral) dilambangkan dengan huruf *n*.

1.1 Isotop Karbon dan Kelimpahannya

Unsur atau atom karbon banyak dijumpai dalam kehidupan sehari-hari dalam bentuk senyawa dengan atom lain. Unsur karbon memiliki beberapa isotop, dan isotop-isotop tersebut pada umumnya dalam bentuk senyawa organik. Sebagai contoh senyawa karbon dengan unsur lain yang banyak dijumpai dalam kehidupan sehari-hari adalah karbondioksida (CO_2) yang merupakan senyawa karbon dengan oksigen.

Atom karbon mempunyai tujuh buah isotop, yaitu: ${}^{9}_{6}C$, ${}^{10}_{6}C$, ${}^{11}_{6}C$, ${}^{12}_{6}C$, ${}^{13}_{6}C$, ${}^{14}_{6}C$, dan ${}^{15}_{6}C$. Kelimpahan isotop dan waktu paro[3] untuk ketujuh isotop karbon tersebut dapat dilihat di Tabel 1.1.

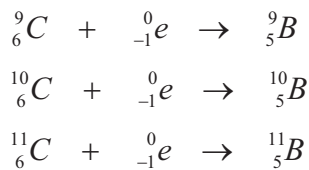
Tabel 1.1 Kelimpahan dan Waktu Paro Isotop Karbon (Krane, 1998)

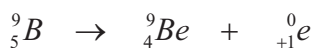
Isotop Karbon	Kelimpahan (%)	Waktu Paro
${}^{9}_{6}C$	-	0,13 detik
${}^{10}_{6}C$	-	19,2 detik
${}^{11}_{6}C$	-	20,4 menit
${}^{12}_{6}C$	98,89 %	Stabil
${}^{13}_{6}C$	1,11 %	Stabil
${}^{14}_{6}C$	-	5.730 tahun
${}^{15}_{6}C$	-	2,45 detik

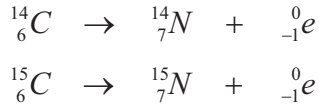
[3] Waktu paro (*half life*) adalah waktu yang diperlukan sebuah unsur radioaktif sehingga aktivitasnya tinggal setengah dari aktivitas mula-mula.

Dari Tabel 1.1 terlihat bahwa isotop karbon ${}^{12}_{6}C$ dan ${}^{13}_{6}C$ merupakan isotop karbon yang stabil dengan kelimpahan di alam masing-masing 98,89 % dan 1,11 % berturut-turut. Isotop-isotop karbon yang lain tidak stabil (radioaktif) dengan waktu paro tertentu sehingga kelimpahannya di alam tidak dapat ditentukan secara pasti.

Sebagaimana kita ketahui dari Fisika Nuklir yang membahas tentang radioaktivitas, unsur atau isotop yang stabil adalah unsur atau isotop yang memiliki jumlah proton dan jumlah neutron yang sama atau hampir sama. Isotop-isotop karbon tidak stabil itu akan menjadi isotop stabil melalui dua cara yaitu melalui tangkapan elektron (*electron capture*) untuk isotop karbon yang jumlah protonnya lebih besar dari jumlah neutron atau melalui pancaran (emisi) elektron untuk isotop-isotop karbon yang jumlah protonnya lebih lebih kecil dari jumlah neutronnya. Dengan demikian, isotop-isotop karbon ${}^{9}_{6}C$, ${}^{10}_{6}C$, dan ${}^{11}_{6}C$ akan menjadi isotop-isotop boron (B) stabil melalui proses tangkapan elektron sebagai berikut:

$$
\begin{aligned}
{}^{9}_{6}C &+ {}^{0}_{-1}e \rightarrow {}^{9}_{5}B \\
{}^{10}_{6}C &+ {}^{0}_{-1}e \rightarrow {}^{10}_{5}B \\
{}^{11}_{6}C &+ {}^{0}_{-1}e \rightarrow {}^{11}_{5}B
\end{aligned}
$$

Isotop-isotop boron ${}^{10}_{5}B$ dan ${}^{11}_{5}C$ adalah isotop boron stabil, sedangkan boron ${}^{9}_{5}B$ kemudian meluruh menjadi berelium (${}^{9}_{4}Be$) stabil dengan cara memancarkan elektron positif (positron, ${}^{0}_{+1}e$) sebagai berikut:

$$
{}^{9}_{5}B \rightarrow {}^{9}_{4}Be + {}^{0}_{+1}e
$$

Pada isotop-isotop karbon ${}^{14}_{6}C$ dan ${}^{15}_{6}C$ terjadi emisi elektron (peluruhan β^-) sebagai berikut:

$$
{}^{14}_{6}C \rightarrow {}^{14}_{7}N + {}^{0}_{-1}e
$$
$$
{}^{15}_{6}C \rightarrow {}^{15}_{7}N + {}^{0}_{-1}e
$$

dengan ${}^{14}_{7}N$ dan ${}^{15}_{7}N$ adalah isotop-isotop nitrogen yang stabil.

1.2 Efek Isotop dan Bilangan Gelombang Molekul Karbondioksida

Kandungan relatif isotop karbon ${}^{14}_{6}C$ terhadap isotop karbon ${}^{12}_{6}C$ di alam hampir tetap, yaitu sekitar 10^{-12} dengan laju peluruhan kira-kira 15 peluruhan tiap menit untuk satu gram karbon dengan waktu paro 5.730 tahun (Krane, 1998). Walaupun isotop karbon ${}^{14}_{6}C$ bersifat radioaktif, kandungan relatifnya terhadap isotop karbon ${}^{12}_{6}C$ di alam tidak berubah karena terjadi pembentukan ${}^{14}_{6}C$ akibat radiasi sinar kosmis dan dari reaksi nuklir buatan manusia seperti peledakan bom nuklir. Jadi, isotop-isotop karbon yang dapat mempengaruhi sifat-sifat kimia dan fisika suatu bahan atau molekul dalam jangka waktu yang relatif lama yang melibatkan atom karbon hanyalah isotop-isotop karbon ${}^{12}_{6}C$, ${}^{13}_{6}C$, dan ${}^{14}_{6}C$. Pengaruh isotop terhadap sifat-sifat kimia dan fisika suatu bahan atau molekul disebut *efek isotop*.

Efek isotop merupakan bahan kajian (penelitian) yang sangat menarik baik penelitian teoretis maupun eksperimen karena dapat memberikan sejumlah informasi yang berguna untuk mengadakan

pendekatan sifat-sifat elektronik suatu atom atau molekul. Dalam spektroskopi molekul, efek isotop dapat diketahui dari bentuk spektrum molekul yang dimanifestasikan oleh pergeseran puncak-puncak serapan pada spektrum vibrasinya atau pergeseran garis-garis Stokes (*Stokes lines*) dan anti-Stokes (*anti-Stokes lines*) pada spektrum rotasi Raman maupun spektrum interaksi vibrasi-rotasinya. Dari bentuk spektrum vibrasi dan rotasi suatu molekul dapat ditentukan besaran-besaran fisisnya seperti frekuensi fundamental, jarak antar inti atom dalam molekul, dan tetapan rotasi.

Pengukuran terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida (CO_2) telah dilaporkan oleh Herzberg (1948), Davies (1963), Decius dan Hexter (1977), Banwell (1983), Sindhu (1985), dan Witteman (1987), seperti diperlihatkan Tabel 1.2. Frekuensi fundamental molekul CO_2 ada 3 buah yaitu ν_1, ν_2, dan ν_3. Frekuensi fundamental akan dijelaskan di Bab 2.

Tabel 1.2 Bilangan Gelombang Frekuensi Fundamental CO_2

Bilangan gelombang (cm^{-1})			Sumber
ν_1	ν_2	ν_3	
1337	667	2349	Herzberg (1949)
1388,7	667,3	2349,3	Davies (1963)
1285	667	2349	Decius dan Hexter (1977)
1330	667,3	2349,3	Banwell (1983)
1340	667	2349	Sindhu (1985)
1351,2	672,2	2396,3	Witteman (1987)

Data tentang bilangan gelombang untuk frekuensi fundamental karbondioksida pada Tabel 1.2 tanpa penjelasan jenis isotop karbon

yang terlibat pada atom aksigen apakah isotop karbon-12, karbon-13, karbon-14 ataukah campuran dari ketiga isotop tersebut sesuai dengan kelimpahannya di alam.

Data vibrasional khususnya data tentang bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida dengan isotop karbon yang berbeda diperoleh dari eksperimen spektroskopi inframerah yang telah dilaporkan oleh Taylor *et al* untuk isotop karbon-12 dan karbon-13 dalam molekul karbondioksida ($^{12}CO_2$ dan $^{13}CO_2$) serta oleh Nielsen *et al* untuk karbon-14 dalam molekul karbondioksida ($^{14}CO_2$) (Wentik Jr, 1959). Bilangan gelombang masing-masing molekul karbondioksida dalam satuan cm^{-1} disajikan pada Tabel 1.3.

Tabel 1.3 Hasil Pengukuran Bilangan Gelombang Frekuensi Fundamental Isotop Molekul CO_2 (Wentik Jr, 1959)

Isotop Molekul	Bilangan gelombang (cm^{-1})		
	ν_1	ν_2	ν_3
$^{12}CO_2$	1354,42	672,20	2396,40
$^{13}CO_2$	1354,42	653,07	2328,20
$^{14}CO_2$	1354,42	636,23	2268,33

Dari Tabel 1.3 terlihat bahwa berdasarkan hasil eksperimen spektroskopi inframerah ada efek isotop karbon terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida, khususnya terhadap bilangan gelombang dengan frekuensi fundamental ν_2 dan ν_3. Efek isotop tersebut berupa penurunan nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental ν_2 dan ν_3 terhadap kenaikan massa isotop

karbon yang ada dalam molekul karbondioksida. Bilangan gelombang untuk frekuensi fundamental ν_1 (untuk regangan setangkup/simetris) pada ketiga molekul isotop tersebut bernilai tetap.

Spektrum rotasional molekul CO_2 hasil eksperimen telah dilaporkan oleh Houston dan Lewis (Herzberg, 1949), Sindhu (1985), dan Bradley *et al* (Witteman, 1987). Salah satu informasi yang sangat penting yang dapat diperoleh dari hasil spektrum rotasional itu adalah *tetapan rotasi* (B). Tetapan rotasi B dapat dihitung secara teoretis dengan menggunakan konsep mekanika kuantum yang menghasilkan relasi (Svanberg, 1991):

$$E_J = BJ(J+1), \quad J = 1, 2, 3, \Lambda \tag{1.1}$$

dengan E_J tenaga rotasi aras yang ke-J, J adalah bilangan kuantum rotasi, dan B adalah tetapan rotasi yang diberikan oleh:

$$B = \frac{h}{8\pi^2 cI}, \tag{1.2}$$

dengan h adalah tetapan Planck, c adalah kecepatan cahaya dalam vakum, dan I adalah momen inersia molekul.

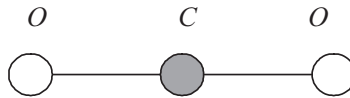
1.3 Momen Inersia Molekul Karbondioksida

Dari persamaan (1.2) terlihat bahwa tetapan rotasi B bergantung pada nilai momen inersia molekul. Momen inersia molekul (I) dapat dihitung dengan menggunakan relasi (Davies, 1963):

$$I = \sum_i m_i r_i^2 \tag{1.3}$$

dengan m_i adalah massa atom ke-i, dan r_i adalah jarak normal atom yang ke-i terhadap sumbu rotasi molekul. Jadi, nilai momen inersia

suatu molekul bergantung pada massa atom-atom pembentuk molekul dan jaraknya ke sumbu rotasi molekul.

Molekul karbondioksida yang memiliki struktur linear setangkup (simetris) dengan atom C sebagai pusat rotasi (Gambar 1.1). Kondisi demikian akan menghasilkan nilai momen inersia yang sama untuk semua isotop karbon. Dengan kata lain, perhitungan momen inersia molekul CO_2 menggunakan persamaan (1.3), dengan menganggap bahwa atom oksigen yang terikat pada atom C adalah isotop oksigen ${}^{16}_{8}O$, tidak dapat memberikan informasi tentang efek isotop karbon pada spektrum rotasinya. Perhitungan teoretis berdasarkan persamaan (1.2) dengan momen inersia yang tidak berubah akan menghasilkan tetapan rotasi yang sama walaupun isotop karbon yang terlibat dalam molekul karbondioksida sudah berubah.

Gambar 1.1 Struktur Molekul CO_2

Seandainya pengaruh jari-jari atom diperhitungkan juga tidak dapat menghasilkan efek yang berarti sebab sangat kecil pengaruhnya. Jari-jari sebuah atom atau isotop dapat dihitung secara teoretis menggunakan relasi (Kaplan, 1964):

$$r = r_0 A^{1/3} \tag{1.4}$$

dengan r_0 bernilai $1{,}4 - 1{,}5 \times 10^{-13}$ cm, dan A adalah massa atom. Jadi pengaruh jari-jari isotop terhadap hasil perhitungan akhir momen inersia molekul sangat kecil sehingga dapat diabaikan.

Berdasarkan pembahasan sebelumnya akan dilakukan perhitungan secara teoretis terhadap bilangan gelombang frekuensi

fundamental untuk ketiga buah isotop molekul karbondioksida dari data hasil eksperimen Bradley *et al* (Witteman, 1987) untuk mengetahui efek isotop karbon pada spektrum interaksi vibrasi-rotasi molekul CO_2 khususnya terhadap tetapan rotasi B pada pita I dan pita II. Hasil kajian ini dapat memberikan informasi yang berguna tentang efek isotop karbon pada spektrum molekul karbondioksida. Isotop karbon yang ditinjau hanyalah karbon-12, karbon-13, dan karbon-14, demikian juga isotop atom oksigen yang digunakan adalah oksigen-16 dengan kelimpahan di alam sekitar 99,76 %.

Secara garis besar kajian teoretis tentang efek isotop karbon pada spektrum molekul karbondioksida memerlukan pengetahuan tentang simetri, grup titik, dan spesies aras vibrasi. Oleh karena itu pada Bab 2 akan ditinjau simetri dan elemen simetri molekul, grup titik, dan spesies molekul. Pada Bab 3 ditinjau landasan teoretis struktur dan bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida, spektrum rotasi Raman, dan spektrum interaksi vibrasi-rotasi. Pada Bab 4 ditinjau efek isotop karbon terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul CO_2 dan hasil analisis data spektroskopi interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida. Hasil kajian teoretis efek isotop karbon terhadap spektrum molekul karbondioksida dirangkum pada Bab 5 yang merupakan kesimpulan dan saran.

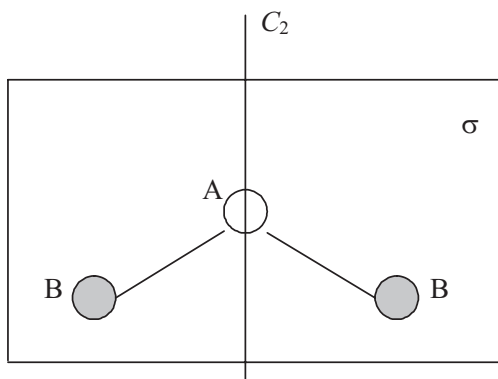
Bab 2
SIMETRI, GRUP TITIK, DAN SPESIES ARAS VIBRASI MOLEKUL

Ada banyak sistem fisis yang dinamikanya ditopang oleh sebuah atau beberapa simetri (Jones, 1996). Sebagai contoh, pertukaran atom karbon dalam molekul karbondioksida tidak akan mengakibatkan perubahan tenaga sistem. Demikian juga, jika molekul karbondioksida itu diputar (dirotasikan) 180^o melalui sumbu molekul tidak akan mengakibatkan perubahan struktur dan geometri molekul sehingga kita tidak dapat membedakan molekul karbondioksida sebelum dan setelah dirotasikan sebesar 180^o. Secara matematis, molekul karbondioksida memiliki simetri rotasi. Simetri yang lain adalah simetri translasi, pencerminan, dan sebagainya. Nilai besaran-besaran fisis yang tidak mengalami perubahan ketika mengalami transformasi koordinat (translasi, rotasi, pencerminan, dan sebagainya) disebut invarian. Walaupun transformasi-transformasi itu berbeda tipe, namun semuanya mempunyai sifat yang sama yaitu membentuk grup. Sifat utama grup adalah adanya produk sebagai hasil dua buah transformasi yang merupakan anggota grup itu juga, ada transformasi identitas, dan masing masing transformasi memiliki invers.

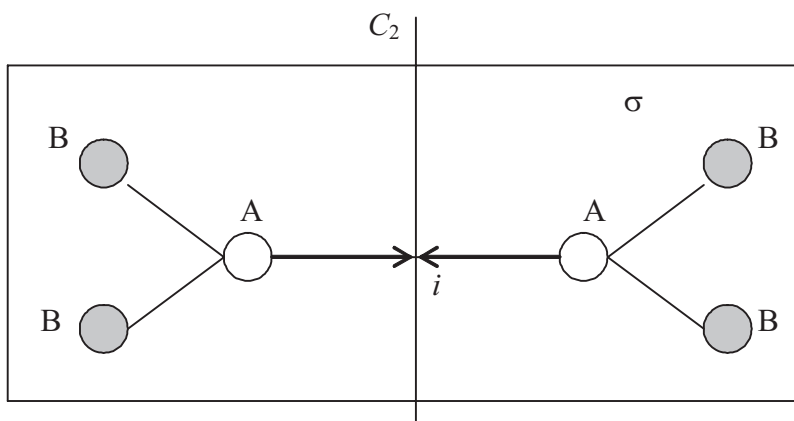
2.1 Simetri dan Operasi Simetri

Sebuah molekul sebagai objek geometri dapat mempunyai satu atau lebih elemen simetri, misalnya bidang simetri, pusat simetri, dan sumbu

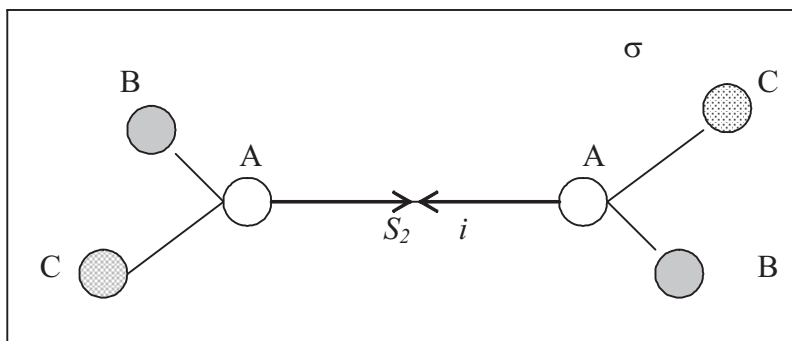
simetri-rotasi pencerminan kelipatan bilangan bulat *p*. Masing-masing elemen simetri berkaitan dengan suatu operasi simetri, misalnya transformasi koordinat berupa pencerminan atau rotasi yang mengakibatkan suatu konfigurasi inti atom dalam sebuah molekul tidak terbedakan dengan konfigurasi molekul sebelum dilakukan transformasi.

Bidang simetri biasanya dilambangkan dengan σ. Jika molekul dicerminkan terhadap bidang simetri, maka hasil pencerminannya tidak terbedakan dengan konfigurasi molekul sebelum dilakukan pencerminan. Sebagai contoh ditinjau molekul triatomik tidak linear AB_2 dengan jarak antar inti atom A-B adalah sama seperti dilukiskan pada Gambar 2.1. Bidang tegaklurus terhadap bidang molekul yang membagi dua sama besar sudut BAB adalah bidang simetri, demikian juga halnya bidang tempat ketiga buah atom tersebut terletak juga merupakan bidang simetri.

Gambar 2.1 Bidang Simetri Molekul Tidak Liniar AB_2

Sebuah molekul juga dapat memiliki pusat simetri. Pusat simetri molekul biasanya dilambangkan dengan huruf i. Molekul dikatakan memiliki pusat simetri jika hasil pencerminan terhadap pusat

simetri tersebut menghasilkan konfigurasi molekul yang tidak dapat dibedakan dengan konfigurasi molekul sebelum dilakukan operasi pencerminan. Untuk menjelaskan pengertian lebih lanjut tentang pusat simetri molekul, kita meninjau sebuah molekul A_2B_4 seperti dilukiskan pada Gambar 2.2.

Gambar 2.2 Molekul A B yang Memiliki Pusat Simetri *i*

Sumbu simetri yang merupakan kelipatan p dinotasikan dengan C_p, dengan p = 1, 2, 3, …. Jika dilakukan rotasi molekul dengan sudut $360^o/p$ maka konfigurasi molekul yang dihasilkan oleh rotasi tersebut tidak terbedakan dengan konfigurasi molekul sebelum rotasi. Dengan demikian, molekul yang dilukiskan pada Gambar 2.1 dan 2.2 yang memiliki C_2 (berarti p = 2) jika dirotasikan melalui sumbu simetrinya sebesar $360^o/2 = 180^o$ maka konfigurasi molekul yang dihasilkan rotasi tersebut tidak terbedakan dengan konfigurasi molekul sebelum rotasi 180^o.

Sumbu simetri yang lain adalah sumbu simetri rotasi-pencerminan. Sumbu simetri rotasi-pencerminan dilambangkan dengan S_p. Sebuah molekul dikatakan memiliki sumbu simetri rotasi-pencerminan kelipatan bilangan bulat p jika dan hanya jika molekul yang mengalami rotasi s$360^o/p$ kemudian dilanjutkan dengan pencerminan terhadap bidang yang tegak lurus sumbu rotasi menghasilkan konfigurasi molekul yang tidak terbedakan dengan konfigurasi sebelum dilakukan operasi rotasi-pencerminan. Sebagai contoh, ditinjau molekul $A_2B_2C_2$ yang mengalami rotasi-pencerminan seperti dilukiskan pada Gambar 2.3. Sumbu rotasi-pencerminan pada Gambar 2.3 berada pada garis yang menghubungkan atom A-A dan yang satu lagi adalah garis yang tegak lurus terhadap garis A-A dalam bidang molekul sedangkan bidang cermin adalah bidang yang tegak lurus terhadap sumbu rotasinya.

Gambar 2.3 Molekul $A_2B_2C_2$ yang Memiliki Sumbu Simetri Rotasi-Pencerminan Kelipatan Dua (S_2)